

**ИЗУЧЕНИЕ АТОМАРНОЙ СТРУКТУРЫ МЕЖЗЕРЕННЫХ ГРАНИЦ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Р.М. Герасимов

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. П.С. Волегов  
Пермский национальный исследовательский политехнический университет,  
Россия, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, 614990  
E-mail: romagrizly@gmail.com

Граница зерен в твердых поликристаллических телах представляет собой переходную область, которая разделяет два соседних зерна, кристаллические решетки которых имеют разную пространственную ориентацию. Знание характеристик и особенностей строения межзеренных границ имеет важное значение при построении и использовании математических моделей неупругого деформирования поликристаллических материалов, поскольку границы оказывают существенное влияние на физико-механические свойства поликристалла. Несмотря на большое количество проводимых исследований межзеренных границ [1–2], общая теория большеугловых границ до сих пор отсутствует. Таким образом, актуальными являются исследования структуры и свойств межзеренных границ, а также анализ устойчивых атомных конфигураций в границе при различных разориентировках решеток зерен, образующих границу.

Целью работы является построение математической модели формирования межзеренных границ в процессе двусторонней кристаллизации с помощью метода молекулярной динамики, а также исследование структуры, энергии и устойчивости полученных границ, изучение зависимости дефектной структуры и энергии границы при различных значениях угла разориентировки кристаллических решеток соседних зерен, в том числе в случае специальных разориентировок.

Выбор метода молекулярной динамики (МД) в контексте работы основывается на том факте, что непрерывные модели материалов на уровне атомарных масштабов являются непригодными ввиду невозможности выделения представительного объема в смысле механики сплошной среды. МД же позволяет представить исследуемый объект в виде совокупности частиц (атомов), которые движутся и взаимодействуют друг с другом согласно законам классической (ньютоновской) механики [3]. Для описания взаимодействия атомов используется потенциал межатомного взаимодействия, который выбирается, исходя из интересующих свойств исследуемого материала.

В рамках работы при выборе потенциала межатомного взаимодействия учитывался тот факт, что исследуемые материалы являются металлами, то есть яркими представителями плотноупакованных систем. Поэтому предпочтительным является потенциал, построенный с помощью модели погруженного атома (EAM) [4], так как при этом подходе учитывается не только парное взаимодействие между атомами, но и взаимодействие электронных облаков и электронного газа, что крайне важно при описании металлов, имеющих металлические связи. Полная потенциальная энергия системы в таком случае выглядит следующим образом:

$$E(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N \left[ \sum_{j>i}^N \Phi(r_{ij}) + F(\rho_i) \right], \quad (1)$$

где  $\Phi$ ,  $\rho$  и  $F$  – функции, описывающие парное межатомное взаимодействие, электронную плотность, создаваемую каждым атомом, и функцию погружения соответственно,  $N$  – число частиц. Вид и параметры функций  $\Phi$ ,  $\rho$ ,  $F$  выбираются исходя из физических особенностей строения материала, для которого строится потенциал.

Задача двусторонней кристаллизации была решена численным интегрированием системы уравнений движения для 120000 частиц, параметры потенциала соответствовали технической чистой меди. Отдельно решена задача генерации начальной термодинамически равновесной конфигурации системы [5], которая представляла собой два зерна, разориентированных относительно друг от друга в пространстве и имеющих кристаллическую ГЦК-структуру, между которыми находился «расплав», имеющий «аморфную» структуру. После геометрического задания структуры исходной системы, проводилась ее релаксация при поддержании постоянной «температуры», превышающей температуру плавления (под температурой в рамках МД моделирования понималась величина, характеризующая меру средней кинетической энергии атомов). Для отвода избыточной энергии, возникающей в процессе кристаллизации, использовались краевые условия третьего рода [6] и принцип термостата

Берендсена. После завершения кристаллизации полученная структура (в том числе – граница) была исследована на устойчивость методом отжига (метод Метрополиса) [7], который подразумевает, что атомы уже «выстроились» в кристаллическую решетку, однако все еще возможны перестройки отдельных атомов. Далее часть атомов перемещают случайным образом в некоторой малой окрестности и пересчитывают полную потенциальную энергию системы; если энергия уменьшилась, то происходит переход из исходного состояния в новое, иначе переход происходит с некоторой вероятностью. Устойчивая конфигурация системы соответствует глобальному минимуму потенциальной энергии атомов.

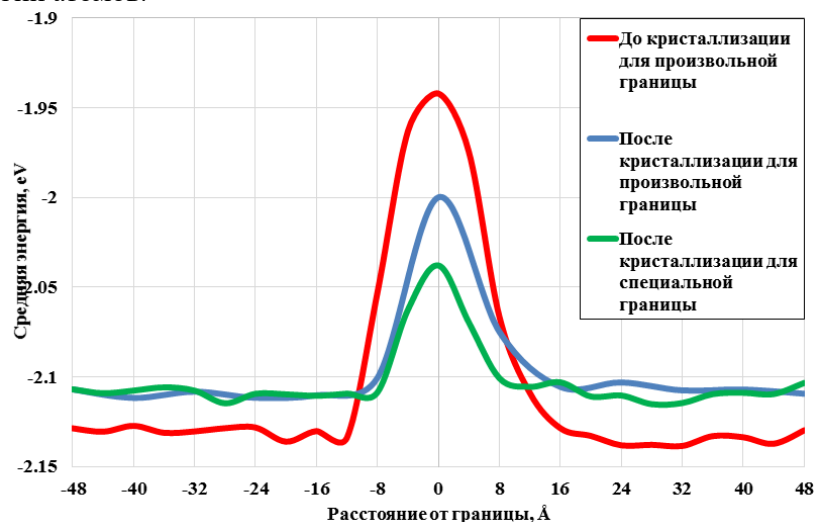


Рис. 1. Зависимость средней энергии (на 1 атом) от координаты «вдоль зерна»

Для полученных устойчивых конфигураций границ проводилась оценка потенциальной энергии взаимодействия атомов. Для этого рассчитано «скользящее» среднее потенциальной энергии межатомного взаимодействия, ширина окна расчета подобрана эмпирически. На рис. 1 представлены зависимости средней потенциальной энергии от расстояния «вдоль» зерна для различных состояний расчетной области. Представленная зависимость позволяет судить об изменениях, произошедших в процессе кристаллизации: энергия границ заметно уменьшается, причем для специальной границы итоговое значение энергии несколько ниже, чем для произвольной границы. Показано, что можно воспринимать границу, как область, которая отличается по величине энергии от энергии кристаллической решетки внутри зерна, к которому примыкает эта граница. В рамках такого определения, представленная зависимость позволяет говорить о толщине границы: она составляет примерно 3-4 межатомным расстояниям. Отметим, что энергия зерен в процессе кристалла несколько возросла, что связано с образованием новых дефектов в результате роста кристаллов.

**Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ №МК-1298.2017.1.**

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cantwell P.R., Tang M., Dillon S.J., Luo J., Rohrer G.S., Harmer M.P. Grain boundary complexions // *Acta Materialia*. – 2014. – Vol. 62, Is. 52. – Pp. 1–48.
2. Tang M., Carter W.C., Cannon R.M. Grain Boundary Transitions in Binary Alloys // *Physical Review Letters*. – 2006. – Vol. 97, Is. 7. – 075502.
3. Rapaport D.C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Second Edition. – Cambridge: University Press, 2004. – 551 p.
4. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Physical Review B*. – 1984. – Vol. 29, Is. 12 – P. 6443–6453.
5. Volegov P.S., Gerasimov R.M. Modeling the Formation of Grain Boundaries as a Result of Two-Sided Crystallization Using Molecular Dynamics // *Key Engineering Materials*. – 2017. – Vol. 743. – pp. 181–186.
6. Мазо А.Б. Основы теории и методы расчета теплопередачи: учебное пособие. – Казань: Казанский университет, 2013. – 144 с.
7. Основные концепции нейронных сетей. – М.: Издательский дом Вильямс, 2003. – 288 с.